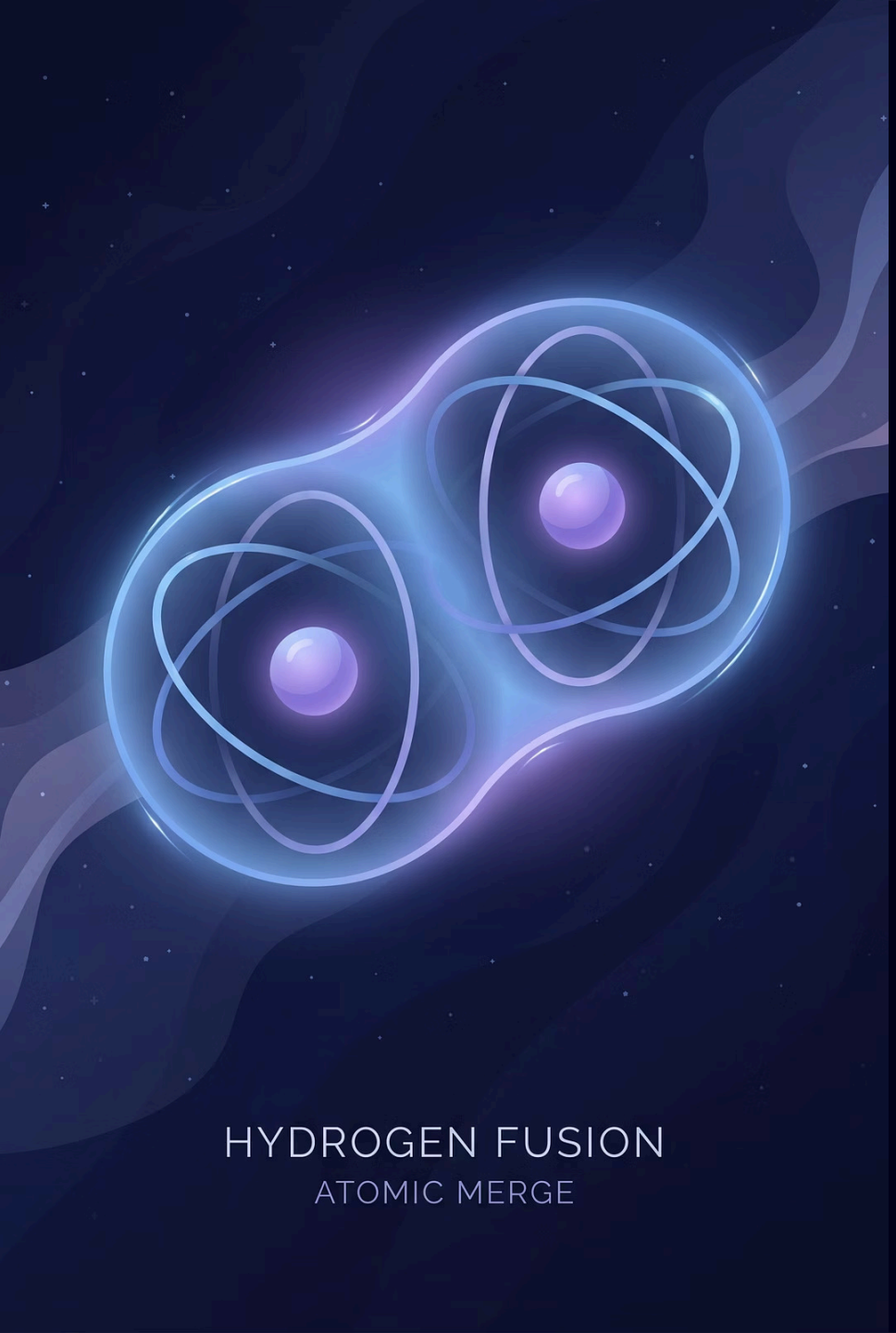


Değerlik Bağı Kuramı: Maddenin İnşa Sanatı

Ders Sunumu

Teradigma

En Basit Molekülde En Derin Soru

İki hidrojen atomunun bir araya gelerek H2 molekülünü oluşturması sıradan bir kimyasal olay değildir.

- Yıldızların doğuşundan hücrelerdeki hayati süreçlere uzanan bir düzenin ilk halkasıdır
- Bu birleşme son derece hassas matematiksel dengeler ve fiziksel yasalar çerçevesinde gerçekleştirilir

> **Tefekkür:** İki bilinçsiz hidrojen atomunun, kendi kendilerine 74 pikometre mesafeyi tespit ederek tam bu noktada durabilmesi ve 436 kJ/mol enerjiye sahip bir bağ kurabilmesi mümkün müdür?

Kimyasal Bağların Üç Kategorisi

Atomlar tek başlarına dururken yüksek enerjili ve kararsızdırlar; birleşerek daha düşük enerjili ve kararlı bir forma geçiş yaparlar.

İyonik Bağ

Elektronların bir atomdan diğerine tamamen transferiyle oluşturulur.

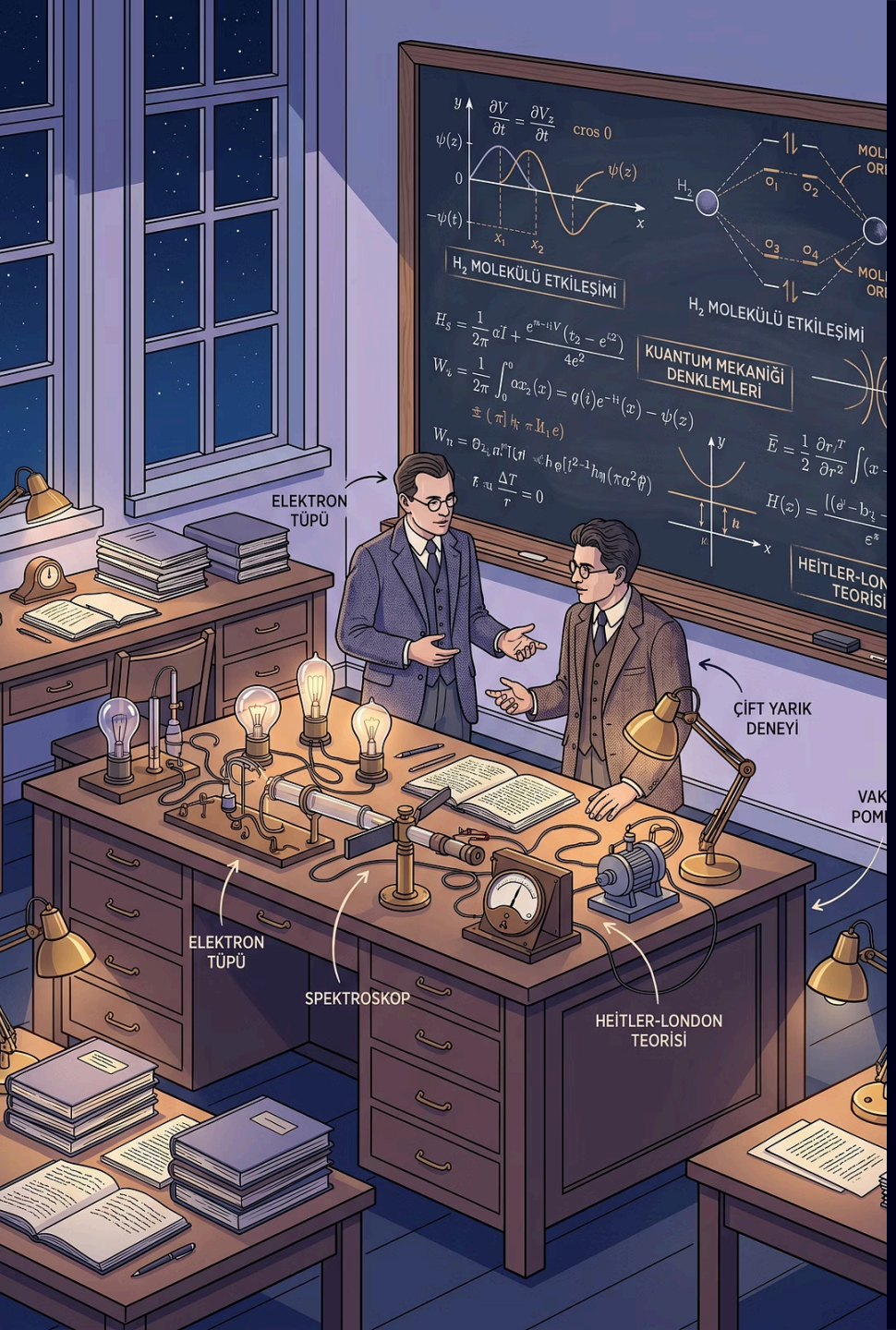
Kovalent Bağ

Elektronların atomlar arasında ortaklaşa kullanılmasıyla gerçekleştirilir.

Metalik Bağ

Elektronların serbest bir deniz gibi metal atomları arasında dolaştırılmasıyla meydana getirilir.

H2 molekülü, kovalent bağın en saf ve en temel örneğidir.

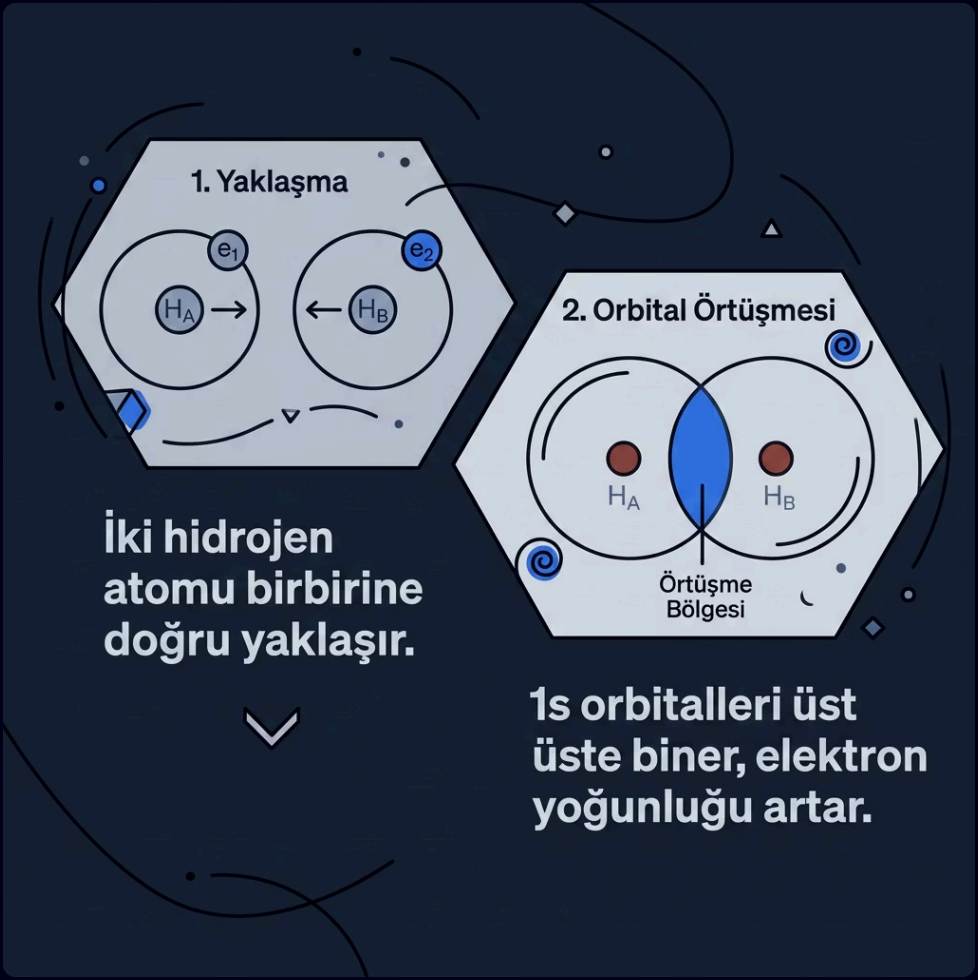


Değerlik Bağı Kuramı Nedir?

1927 yılında Walter Heitler ve Fritz London tarafından geliştirilen bu kuram, kovalent bağların nasıl oluşturulduğunu kuantum mekaniğinin ilkeleriyle açıklar.

- Hidrojen molekülünün varlığını matematiksel olarak kanıtlayan ilk başarılı çalışmadır
- Bağ oluşumu dört aşamalı bir mekanizma üzerinde tanımlanmıştır: yaklaşma, orbital örtüşmesi, elektron ortaklaşması ve spin eşleşmesi

Bağ Oluşumunun 1. ve 2. Adımı



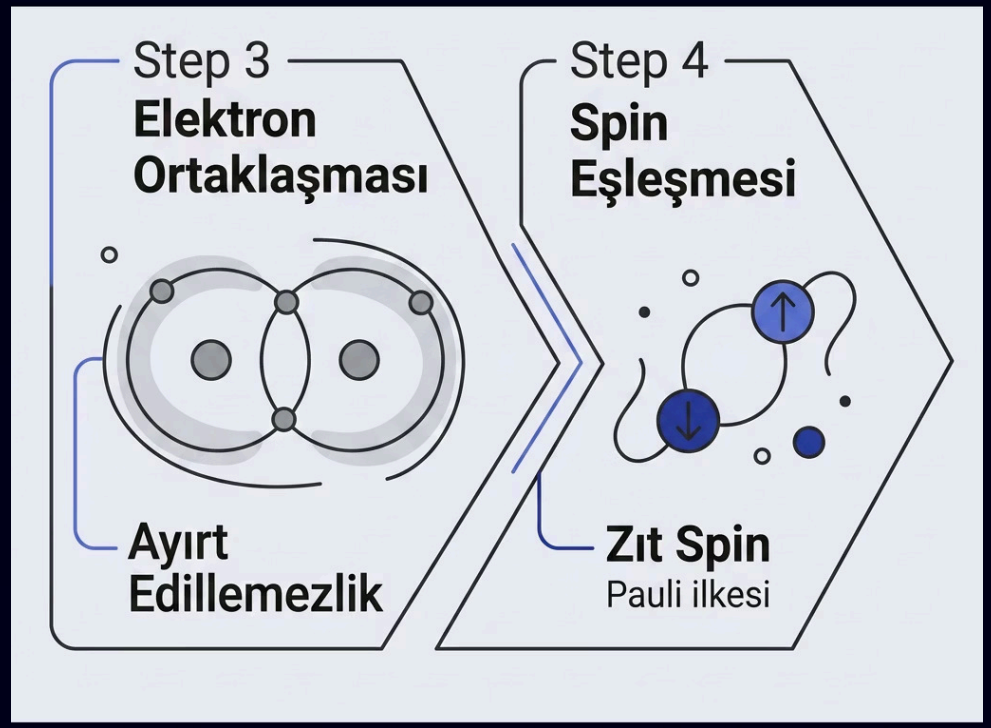
1. Yaklaşma Aşaması

İki hidrojen atomu (HA ve HB) birbirine yaklaşmaya başlar; her birinin çekirdeği etrafında bir elektron (e1 ve e2) bulunur.

2. Orbital Örtüşmesi

Atomlar belirli bir mesafeye geldiğinde, 1s orbitalleri birbirleriyle örtüşmeye başlar — uzayda iki kürenin kesişmesi gibi fiziksel bir olaydır.

Bağ Oluşumunun 3. ve 4. Adımı



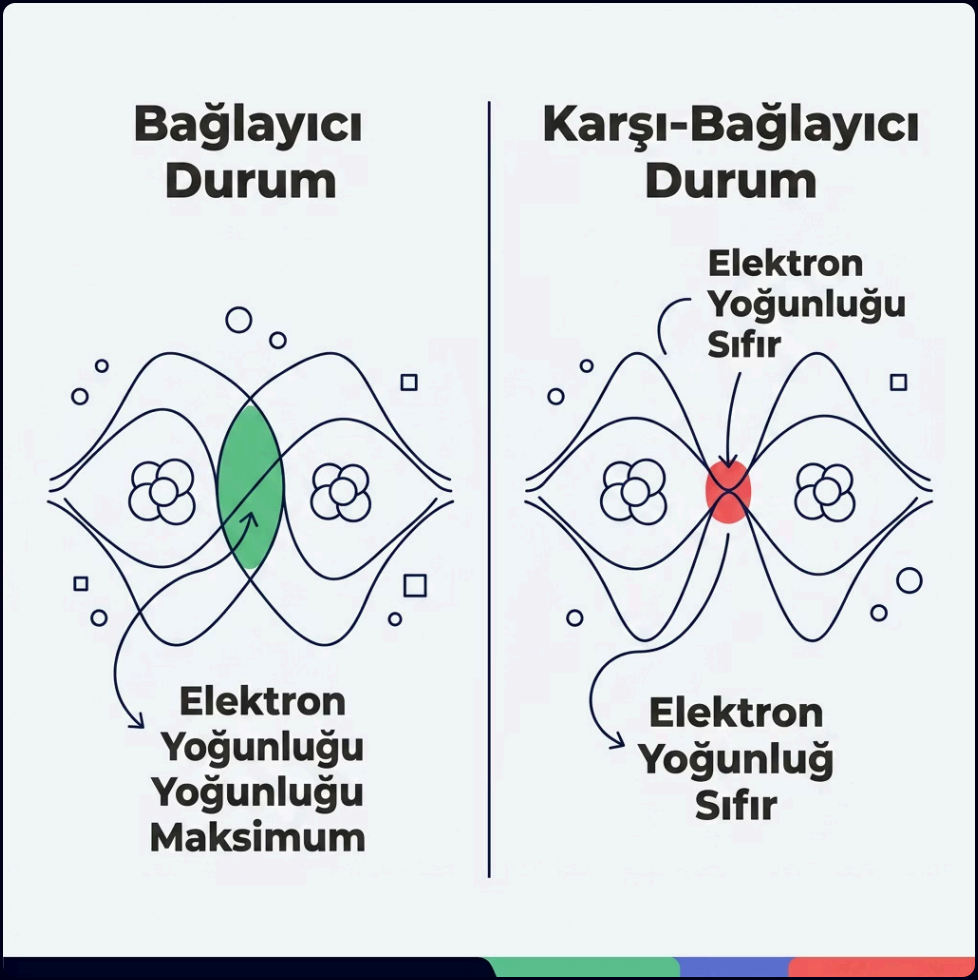
3. Elektron Ortaklaşması

Kuantum mekaniğinin ayırt edilemezlik ilkesi devreye girer; artık hangi elektronun hangi atoma ait olduğunu söylemek imkansızdır. Her iki elektron da her iki çekirdeği eşit biçimde gözetir hale getirilir.

4. Spin Eşleşmesi

Bağın oluşabilmesi için elektronların spinleri zıt olmak zorundadır — biri saat yönünde, diğeri tersine. Bu zorunluluk Pauli Dışlama İlkesi'nden kaynaklanır.

İki Senaryo: Bağ Kurulur mu, Kurulmaz mı?



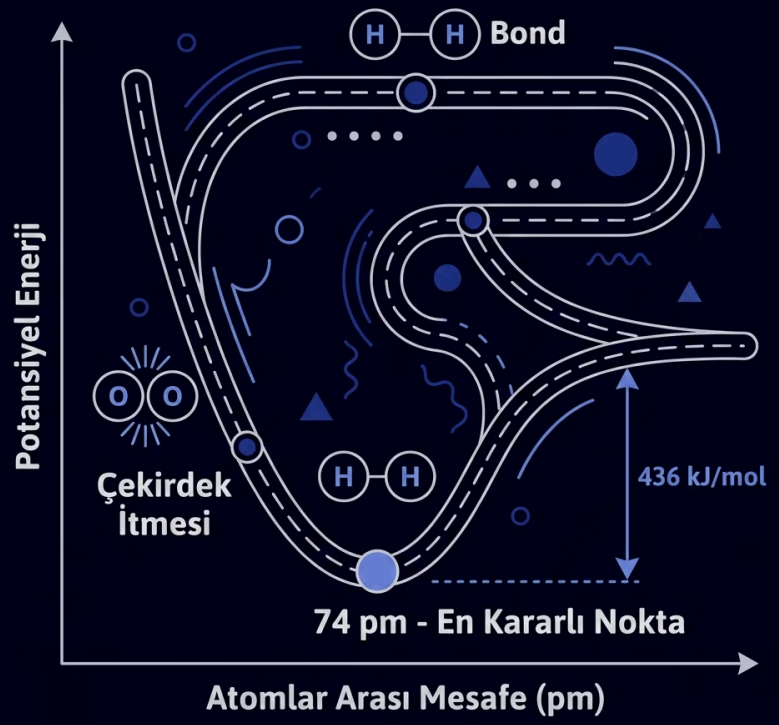
Bağlayıcı Durum — Molekül Oluşturulur

Zıt spinli elektronların dalga fonksiyonları yapıcı girişim yapar; iki çekirdeğin tam ortasında elektron yoğunluğu maksimuma ulaşır ve çekirdekler bu negatif yük bulutuna çekilir.

Karşı-Bağlayıcı Durum — Molekül Oluşturulamaz

Paralel spinli elektronların dalga fonksiyonları yıkıcı girişim yapar; orta bölgede elektron bulunma olasılığı sıfıra düşer, çekirdekler birbirini iter.

74 Pikometre: Hassas Ayarın Somut Örneği



Heitler-London hesaplamaları, iki hidrojen atomunun tam **74 pikometre** (pm) mesafede en kararlı hale getirildiğini göstermiştir (1 pm = 10^{-12} m).

Bu bağı koparmak için gereken enerji: tam **436 kJ/mol**

Daha Yakın

Çekirdekler arası pozitif-pozitif itme aşırı güçlenir.

Daha Uzak

Elektronların çekirdekleri bağlama gücü zayıflar.

Tam 74 pm

Bu iki kuvvet mükemmel bir denge oluşturacak şekilde ayarlanmıştır.

Bağın Gerçek Fiziksel Temeli: Ruedenberg Analizi

Klaus Ruedenberg'in 1960'lardaki kuantum mekaniksel analizi, bağ oluşumunun basit bir elektrostatik çekim olmadığını ortaya koymuştur.

1. Delokalizasyon

Elektronlar iki çekirdeği kapsayan daha geniş bir hacimde hareket ettirilir; bu genişleme, Heisenberg Belirsizlik İlkesi gereği kinetik enerjiyi düşürür.

2. Orbital Büzülmesi

Bu kinetik enerji tasarrufu, elektronların çekirdeklere daha yakın çekilmesine (orbital büzülmesi) izin verir; potansiyel enerji düşer ve sistem daha kararlı bir konuma oturur.

Pauli Dışlama İlkesi: Maddenin Hacim Kazanması

İki özdeş fermiyonun aynı kuantum durumunda bulunamayacağını belirleyen bu ilke, maddenin var olabilmesinin temelidir.

H2 Bağında Uygulama

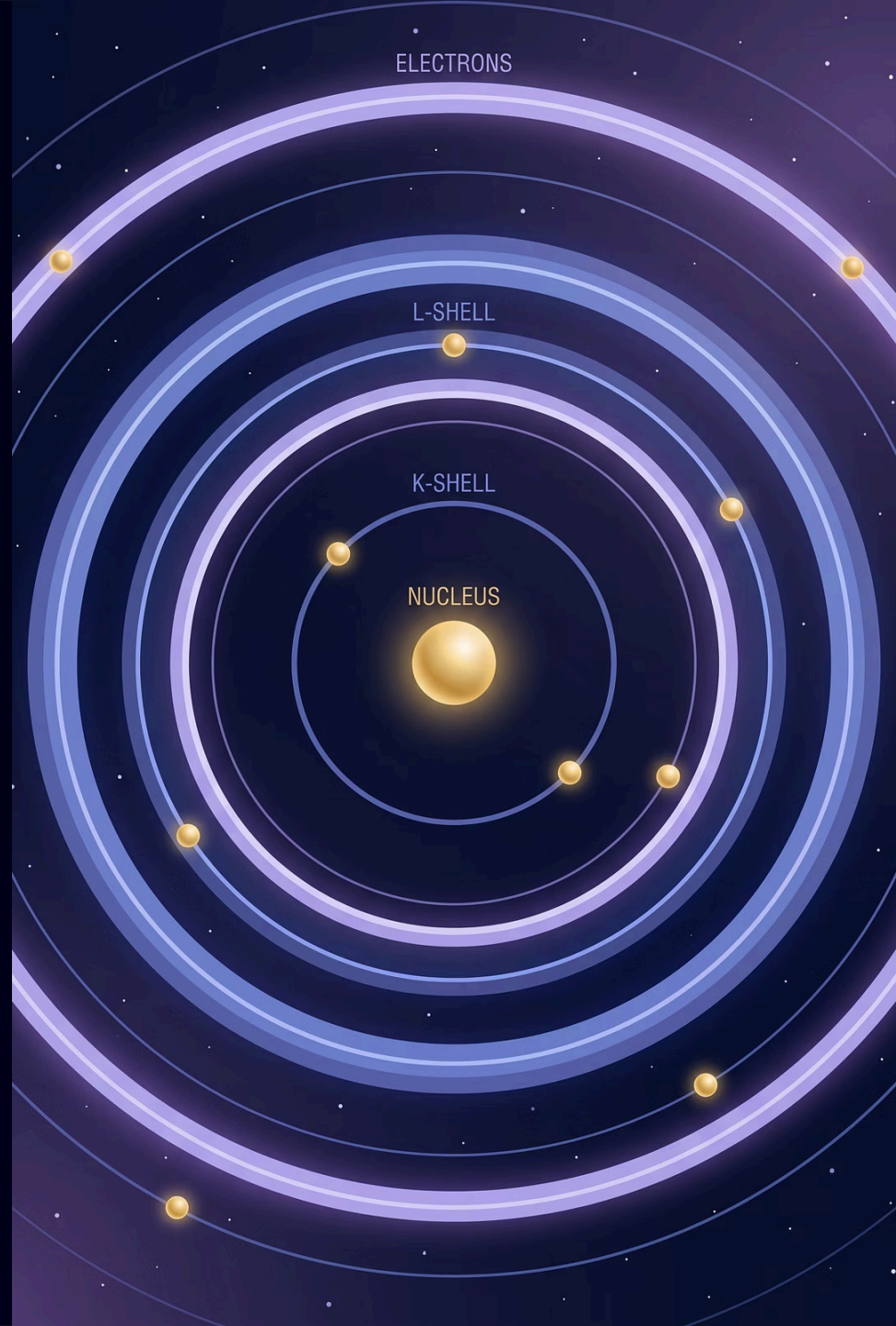
İki elektron aynı bölgeyi paylaşabilmek için mutlaka zıt spinli olmak zorundadır.

Dyson ve Lenard İspatı (1967)

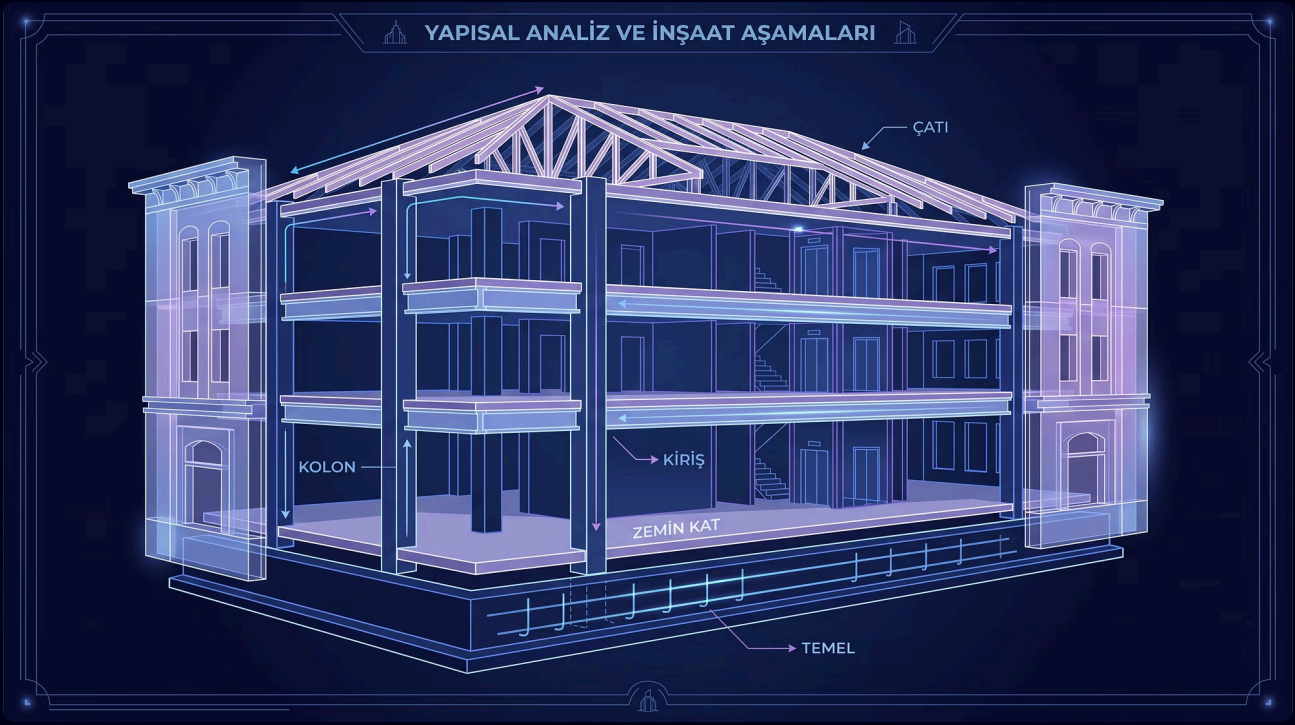
Stability of Matter çalışması: maddenin çökmeden kararlı durmasının bu ilkeye dayandığını göstermiştir.

Bu İlke Olmasaydı

Tüm elektronlar en düşük enerji seviyesine yığılırdı; atomlar inanılmaz küçük ve yoğun bir hacme çökerdi.



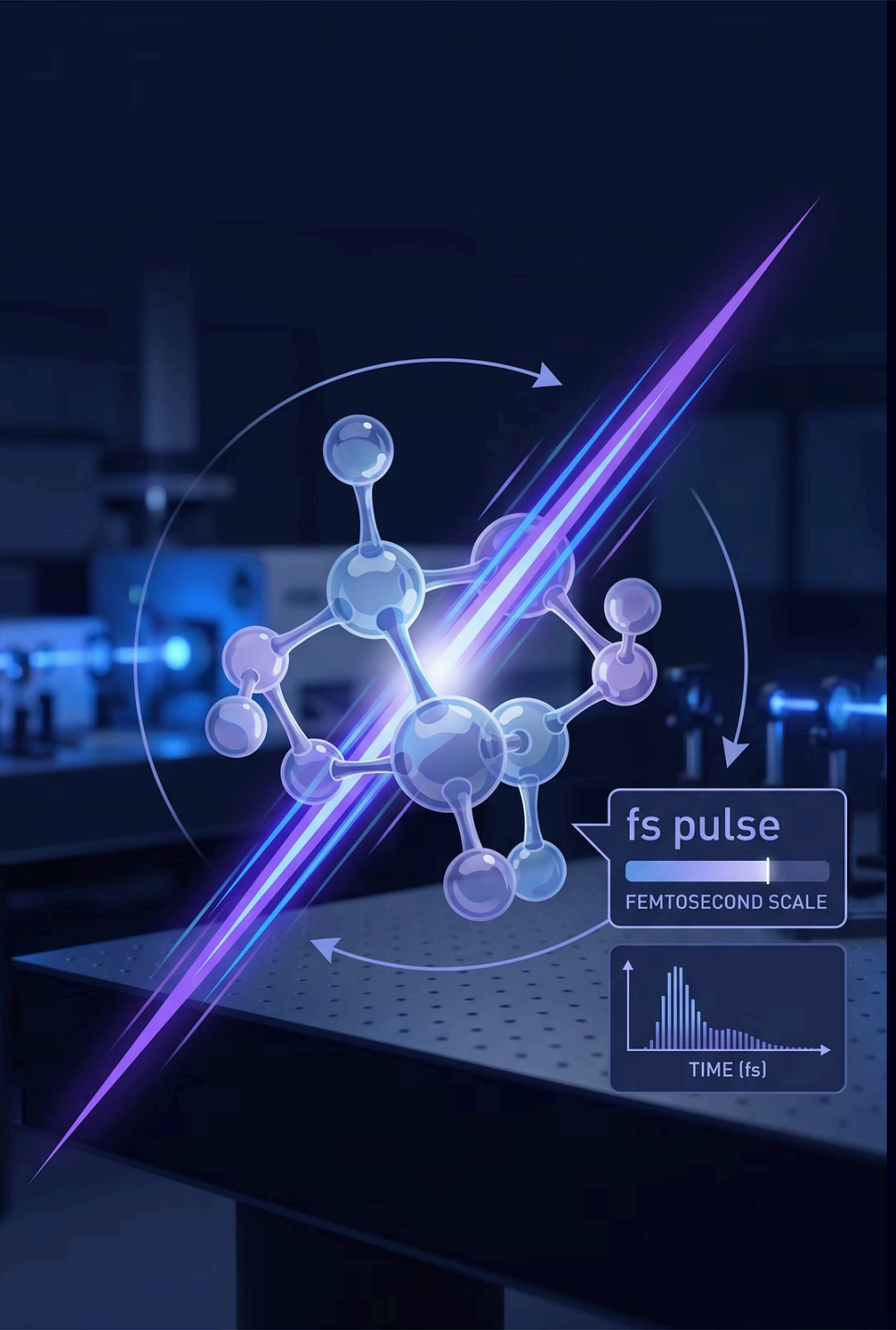
Pauli İlkesi: Maddenin "İmar Kuralı"



Pauli Dışlama İlkesi, elektronların farklı enerji seviyelerine yerleştirilmesini zorunlu kılar.

> Bu kural "kendiliğinden" geçerli değildir. Peki bu ilkeyi atomların üzerine kim yerleştirdi?

- Bu zorunluluk atomlara hacim kazandırır.
- Karmaşık yapıların ve canlı sistemlerin oluşabileceği fiziksel uzayı var eder.
- Sanki maddenin inşasında kullanılan temel bir imar kuralı gibidir: parçacıkların üst üste yığılması engellenir.

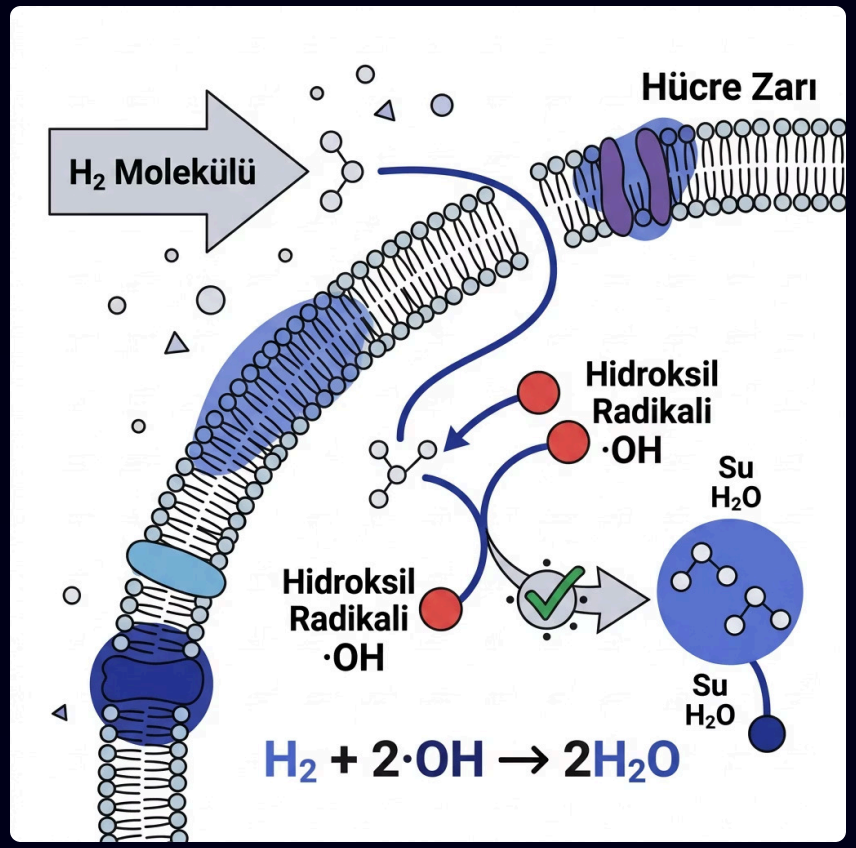


Güncel Bulgular: Femtosaniye Hassasiyeti

2022–2024 yılları arasındaki çalışmalar, Değerlik Bağı Kuramı'nın hâlâ geliştirildiğini göstermektedir.

Yeni ab initio (ilk prensipler) metotları, H2 bağlarının davranışını 10^{-15} saniye (femtosaniye) hassasiyetiyle modelleyebilmektedir.

H2'nin Biyolojik Rolü



H2 molekülü, son yıllarda biyolojik sistemlerde önemli bir antioksidan olarak keşfedilmiştir.

- Hücrelerdeki zararlı serbest radikalleri — özellikle hidroksil radikali (·OH) — seçici olarak nötralize eder

$$H_2 + 2 \cdot OH \rightarrow 2H_2O$$

Kalp Hastalıkları

Terapötik etkileri araştırılmaktadır.

Nörodejeneratif Hastalıklar

Koruyucu etkileri incelenmektedir.

COVID-19

Klinik çalışmalar sürmektedir.

H2'nin Kozmolojik Rolü

The first stars: early universe formation.

Evrenin ilk yıldızlarının oluşumunda H2 molekülü kritik bir soğutma ajanı işlevi görmüştür.

Soğutma Mekanizması

Başlangıçtan sonra sıcak hidrojen atomlarının H2 moleküllerine dönüştürülmesi, gaz bulutlarının soğuyup çökerek yıldızları oluşturmasını sağlamıştır.

Kozmik Anlam

En küçük kimyasal birim, evrenin büyük ölçekli yapısının inşasına doğrudan hizmet etmek üzere işlevlendirilmiştir.

Bilinçsiz Atomlar, Hassas Sonuçlar

H2 bağının oluşumunda gerçekleştirilen işlemler şunlardır:

74 pm Mesafe

Tam bu mesafeyi tutturmak

Zıt Spin

Zıt spinlerde eşleşmek

Yapıcı Girişim

Dalga fonksiyonlarını birleştirmek

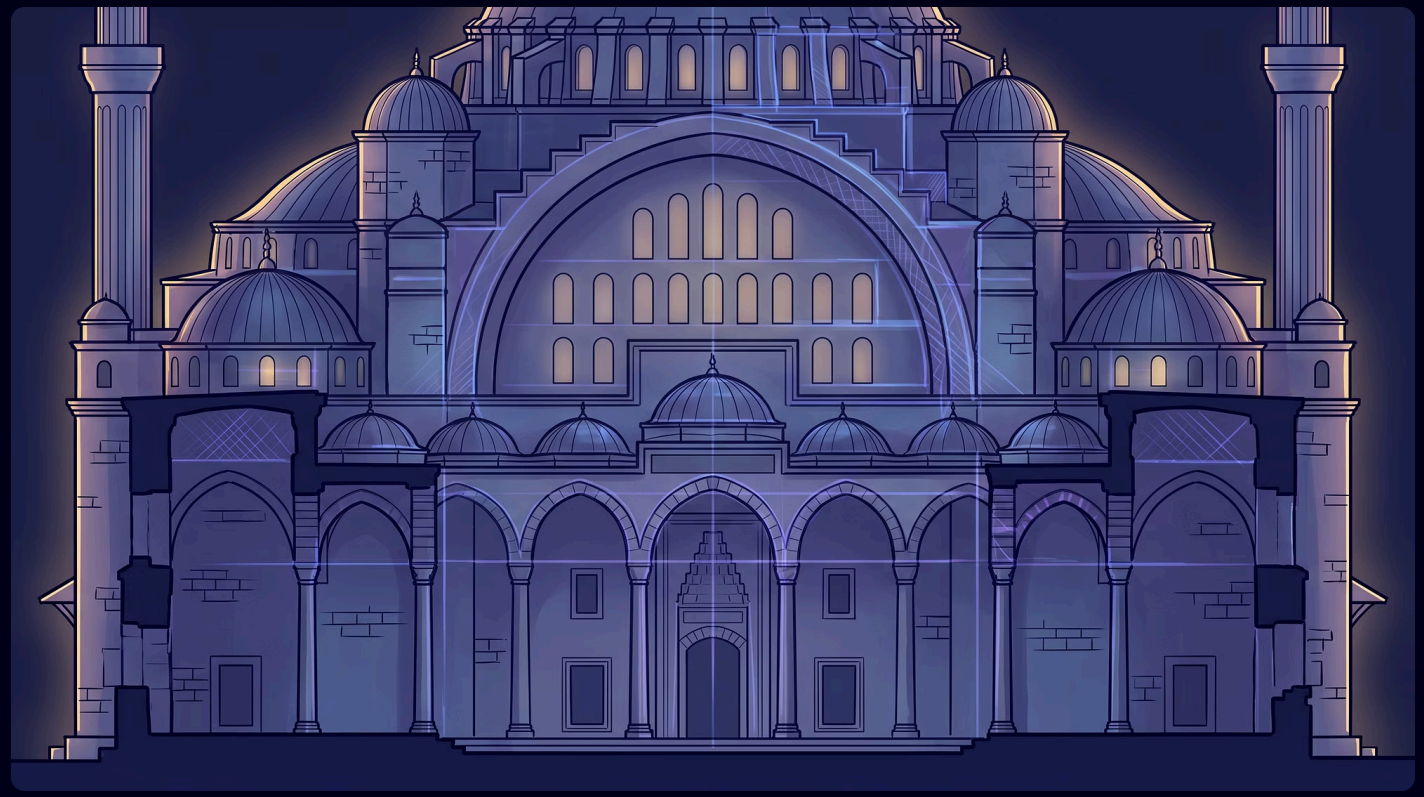
Enerji Optimizasyonu

Kinetik ve potansiyel enerjiyi optimize ederek en kararlı durumu bulmak

Ancak bir hidrojen atomu düşünemez, hesap yapamaz, karar veremez. Bu işlemler onlar tarafından değil — onlar üzerinde işleyen yasalar çerçevesinde gerçekleştirilmektedir.

> Asıl soru şudur: Bu yasaları kim koydu? Bu hassas sabitleri kim ayarladı?

Hammadde ile Sanat Eseri Arasındaki Fark



Bir taş yığını ile Süleymaniye Camii aynı hammaddeden yapılmıştır; fark hammaddede değil, kurulan düzende ve plandadır.

Hidrojen atomları sadece proton ve elektrondan oluşan hammaddelerdir. Ancak bu hammaddelerin:

- bir tasarım gerektirir, bir ilim gerektirir, bir sanat gerektirir.

→ Pauli ilkesine göre düzenlenmesi → Heisenberg sınırlarında işletilmesi → 74 pm'de durdurulması

Fine-Tuning: Sabitler "Anlaşmış" Gibi

Fiziksel sabitlerin her biri, sanki birbiriyle koordineli biçimde ayarlanmış gibi mükemmel bir uyum içindedir.

Planck Sabiti (ħ)

Farklı olsaydı atomlar oluşturulamazdı.

Elektron Kütlesi

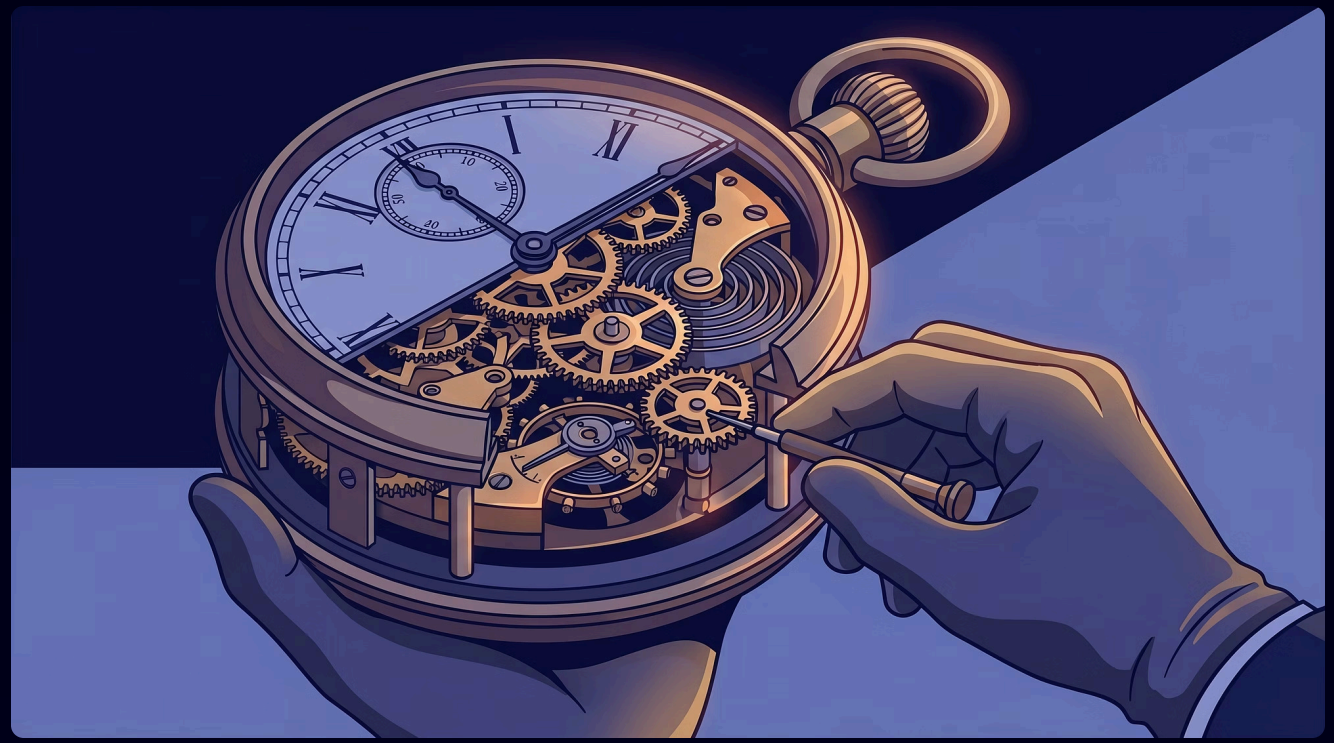
Biraz farklı olsaydı kimyasal bağlar kurulamazdı.

Pauli İlkesi

Geçerli olmasaydı madde çökerdi.

> Bu uyum, maddenin arkasında bir **İrade**, bir **İlim**, bir **Kudret** olduğuna işaret eder.

İndirgemeci Dilin Yetersizliği



"Atomlar bir araya geldi", "moleküller organize oldu" gibi ifadeler sanki atomların bir iradeye sahip olduğunu ima eder. Oysa bunlar yalnızca süreçlerin adlarıdır.

- Bir süreç, fail olamaz.
- Saat yürür, ama saati yapan saatçidir.
- H2 molekülündeki düzen, üzerinde işleyen yasaların ve bu yasaları koyan İlahi İrade'nin eseridir.

Sentez: Maddenin Haykırdığı Gerçek

H2 molekülünde gördüğümüz tablonun özeti:

Femtosaniye Hassasiyeti

Bilinçsiz atomlar üzerinde femtosaniye hassasiyetinde bir sistem çalıştırılmaktadır.

Eş Zamanlı Kurgu

Bu sistem için Pauli ilkesi, Heisenberg belirsizliği, spin eşleşmesi ve enerji optimizasyonu eş zamanlı olarak kurgulanmıştır.

İnşa Edilmiş Sanat Eseri

En basit "harf"te bile bu kadar mükemmel bir düzen varken maddenin bir "tesadüf yığını" değil, **inşa edilmiş bir sanat eseri** olduğu görülmektedir.

> Harfler kendiliğinden bir araya gelerek kitap oluşturamaz. Bu kitabı yazan Müellif'in varlığını görmezden gelmek mümkün müdür?